

# СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ УПРУГИХ МОДУЛЕЙ ГРАФЕНА, РАССЧИТАННЫХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО МЕТОДА РМ6 И МКЭ

**Матулис В. Э., Матулис В. Э., Нагорный Ю. Е., Репченков В. И.,  
Ивашкевич О. А.**

*Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь,  
e-mail: nagorny.yury@gmail.com*

В данной работе вычислены упругие модули графена в рамках МКЭ (поле центральных сил (ПЦС) и валентно-силовое поле (ВСП)) и в рамках квантово-химического метода РМ6. В первых двух случаях учитывалась связь соседних атомов и через одного (в ПЦС моделировалась упругим отрезком, а в ВСП – упругим углом). В квантово-химическом расчете учитывались взаимодействия всех атомов между собой. В МКЭ жесткость валентной связи задавалась  $k_1=938 \text{ kcal}/(\text{mol } \text{\AA}^2)$ , а упругого угла  $k_\theta=126 \text{ kcal}/(\text{mol rad}^2)$  [1], для ПЦС жесткость линейной отрезка пересчитывалась через равенство энергий с угловым элементом.

Рассматриваются образцы размером от  $3 \times 3$  шестиугольные ячейки до  $11 \times 19$ . Шаг по горизонтали равен одна, а по вертикали – две ячейки. Пластина подвергается двум схемам нагружения. В первом случае свободному растяжению по вертикали под действием нагрузки равномерно распределенной по остриям верхней горизонтальной границы типа “зигзаг”. Во втором случае в каждом узле правой границы типа “кресло” действовала одинаковая растягивающая горизонтальная сила. В обоих случаях нижняя граница была закреплена по вертикали, а левая – по горизонтали.

По полученным смещениям вычислялись модуль Юнга и коэффициент Пуассона. При этом поперечное сечение определялось как произведение межслоевого расстояния в графите на расстояния между крайними ядрами плюс два радиуса Ван-дер-Ваальса (1.7 ангстрем). В качестве удлинения образца брались средние значения.

Растяжение на границе типа зигзаг дало следующие результаты. Общим для всех методов расчета является монотонное увеличение модуля Юнга с ростом размера образца и выход графиков на асимптоту. Для ПЦС от 0,879 ТПа до 1,238 ТПа, ВСП от 0,687 ТПа до 0,782 ТПа. Значения квантово-химического расчета лежат между 0,805 и 1,010 ТПа. Графики коэффициента Пуассона в случаях ВСП и РМ6 плавно убывают от 0,345 до 0,293 и от 0,416 до 0,399, соответственно. Приближение ПЦС, по-видимому, физически не корректно, так как модуль растет от 0,506 до 0,535, превышая величину 0.5, что недопустимо для сплошных тел.

В случае границы типа кресло в ПЦС модуль Юнга монотонно увеличивается от 1,160 ТПа до 1,305 ТПа, а в ВСП плавно падает от 0,861 ТПа до 0,812 ТПа, оба стремятся к асимптоте. Значения квантово-химического расчета показывают рост от 0,936 ТПа до 1,050 ТПа. Графики коэффициента Пуассона монотонно убывают. В случаях ПЦС значения от 0,740 до 0,567, ВСП от 0,432 до 0,304 и для РМ6 занимают положение между величинами 0,540 и 0,412.

**Литература**